

영역분할법과 유한요소해석을 이용한 유동장의 병렬계산

최형권*·김범준**·강성우***·유정열+

Parallel Computation of a Flow Field Using FEM and Domain Decomposition Method

Hyounggwon Choi* · Beomjun Kim** · Sungwoo Kang*** · Jung Yul Yoo[†]

Key words : Parallel Computing(병렬컴퓨팅), CFD(전산유체역학), Finite Element Method(유한요소법), Turbulent Flow(난류 유동장)

Abstract

Parallel finite element code has been recently developed for the analysis of the incompressible Navier-Stokes equations using domain decomposition method. Metis and MPI libraries are used for the domain partitioning of an unstructured mesh and the data communication between sub-domains, respectively. For unsteady computation of the incompressible Navier-Stokes equations, 4-step splitting method is combined with P1P1 finite element formulation. Smagorinsky and dynamic model are implemented for the simulation of turbulent flows. For the validation performance-estimation of the developed parallel code, three-dimensional Laplace equation has been solved. It has been found that the speed-up of 40 has been obtained from the present parallel code for the benchmark problem. Lastly, the turbulent flows around the MIRA model and Tiburon model have been solved using 32 processors on IBM SMP cluster and unstructured mesh. The computed drag coefficient agrees better with the existing experiment as the mesh resolution of the region increases, where the variation of pressure is severe.

1. 서론

최근에 고성능의 병렬 컴퓨터의 도입에 따라 많은 계산시간과 기억용량을 요구하는 대규모의 문제들이 해석되기 시작하고 있다[1]. 특히, 예전에 비해 기억용량의 문제 가 실제적인 대규모의 문제를 해석하는데 있어서 제한 조건이 되는 경우가 적어지면서, 유한 차분법에 비해서 많은 기억용량을 요구하는 단점 때문에 열유체 해석에서 많이 사용되지 않았던 유한 요소법은 최근 들어 유용한 해석 도구로서 사용되어지고 있으며, 앞으로 더 많이 쓰여지리라 여겨진다[2]. 이는 유한 요소법이 유한 차분법에 비해서 경계조건을 정확하고 쉽게 처리하며, 복잡한 형상을 가지는 물체주위의 유동장을 해석하기 위해서 비정렬 격자계를 사용할 경우 선형요소로써 2차 정확도의 공간 차분을 자연적으로 얻어내는 이점이 있기 때문이다. 본 연구실[3]에서는 지난 수 년 동안 복잡한 형상을 가지는 3차원 물체 주위의 유동장 문제를 해석하기 위해서 유한 요소법을 이용한 비압축성 유동해석코드[4-5]를 개발했으며, 최근에는 병렬화 된 열유체 해석용 유한요소해석 프로그램을 개발하여 다양한 대규모의 열유동장 해석문제에 적용하고 있다. 개발된 코드는 영역분할방법을 이용하여 병렬화 되

었다. 각 영역간의 데이터 교환을 위하여 MPI library를 사용하였다. 영역분할은 Metis-lib 를 이용하였다. 병렬해법으로는 운동량방정식에는 Bi-CGSTA[6]를 이용하고, 압력 방정식에 대해서는 Conjugate Gradient Method를 이용하였다. 반복해법의 병렬화에 있어서 가장 중요한 부분은 예조건 인자 (Preconditioner)를 병렬화 시키는 것인데, 본 연구실에서는 여러 가지 다양한 병렬 예조건 인자의 성능을 비교 평가 한 후, MIRA모델 주위의 난류유동장의 계산에는 BIWO (Block ILU without overlap)을 병렬 예조건 인자로 사용하였다. 개발된 병렬코드의 검증과 효율을 측정하기 위하여 표준예제로 2차원 및 3차원 Laplace 방정식과 정육면체 내의 자연대류문제를 해석하였다. 본 논문의 2.1 절에서는 비압축성유동장의 해석을 위한 수치해석 방법에 대해 설명하고, 2.2 절에서는 MIRA 계산에 사용된 병렬 예조건 인자를 간략히 설명하고, 2.3 절에서는 병렬코드의 성능 예측을 위하여 수행된 계산결과를 그리고 2.4 절에서는 MIRA 모델과 Tiburon 모델주위의 난류유동장 해석에 대한 병렬계산결과를 소개하고자 한다.

2. 본론

2.1 수치해석 방법

Choi 와 Moin[7]에 의해 제안되었으며 Choi 등[5]에 의해 같

* 서울대학교 BK21 기계분야사업단, choi@vortex.snu.ac.kr

** 서울대학교 대학원, nimitz68@snu.ac.kr

*** 서울대학교 대학원, HYPERON@hitel.net

+ 서울대학교, jyyoo@plaza.snu.ac.kr

은 차수 유한 요소법에 적용된 4 단계 분리 계산법을 채택하였다. 이전 시간에서의 압력장이 주어졌을 때 첫 번째 단계에서는 비선형 비압축성 운동량 방정식을 풀게 된다.

Find $\hat{U} \in H^1$ such that

$$\int W \frac{D\hat{U}}{Dt} + \nabla W : \tilde{\sigma} d\Omega = 0 \quad \text{for all admissible functions}$$

$$w \in V_h, \quad V_h = \left\{ v_h \mid v_h \in H^1, v_h = 0 \text{ on } \Gamma_g \right\} \quad (1)$$

$$\tilde{\sigma} = -pI + \tau, \quad \tau = 2\nu_e \hat{D}_{ij}$$

$$\nu_e = \nu + \nu_t, \quad \nu_t = C\Delta^2 \bar{S}$$

$$\bar{S} = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}, \quad S_{ij} = D_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i})$$

중간 (intermediate) 속도의 경계 조건은 $\hat{U} = U^{n+1}$ 이다 [5]. 이 식으로부터 나타나는 비대칭 행렬은 병렬 예조건화된 Bi-CGSTAB 을 풀게 된다. 두 번째 단계에서는 이전 단계에서 구한 압력장으로부터 다음과 같은 식을 풀게 된다.

$$\frac{U^* - \hat{U}}{\Delta t} = \nabla p'' \quad (2)$$

그 다음 단계에서는 divergence-free 조건으로부터 Poisson 형식의 압력 방정식의 해를 구하고 생성된 압력장으로부터 속도장을 수정한다.

$$\Delta t \nabla^2 p^{n+1} = \nabla \cdot u^* \quad (3)$$

출구에서의 압력 경계 조건은 traction-free 조건과 첫 번째 단계에서 사용된 경계 조건으로부터 다음과 같이 유도된다.

$$p^{n+1} = \tau^{n+1} = \hat{\tau} \quad (4)$$

SPD (symmetric positive-definite) 행렬은 병렬 Conjugate Gradient 방법을 사용하여 반복적으로 해를 구한다. 운동량과 압력 방정식의 병렬 예조건화 기법으로 BIWO 방법[8]을 사용 한다. 높은 레이놀즈 수 유동의 해석에서는 SUPG (streamline upwind Petrov-Galerkin) 방법을 적용하였다. 이 경우 수식 (1)의 Galerkin 가중치는 다음과 같이 수정된다.

$$\tilde{W} = W + sU \cdot \nabla W \quad \text{where } s = \frac{\alpha h_e}{2|u|_e} \quad (5)$$

α 는 요소 페클릿 수의 함수이며 h_e 는 유한요소의 특성 길이이다. $Re = 2.6 \times 10^6$ 일 때의 MIRA 모델 주위의 유동을 해석하기 위해 약 300 만개의 격자를 32 개의 프로세서에 분할하여 사용하였다. 높은 레이놀즈 수 유동에서 Galerkin 방법으로 안정된 해를 구하기 위해서는 부족한 격자 수이므로 MIRA 모델 주위의 LES 해석을 위해서 SUPG를 사용하였다.

난류 모델로는 Smagorinsky 모델을 사용하였다. Smagorinsky 모델에서는 유동장에 상관없이 $C=0.01$ 이며 ν_t 는 수식 (1)에서 주어진다.

2.2 병렬예조건 인자

병렬 컴퓨터를 사용하여 문제를 해석하기 위해 전체 격자를 구성한 후 계산 영역을 여러 개의 국소영역으로 나누는 영역분할법을 사용한다. 각 프로세서는 할당된 영역에서 독립적으로 국소행렬을 구성하며 구성된 각 국소행렬의 합으로 얻어지는 전체행렬을 풀기 위해 영역의 경계에서 자료의 교환이 필요하다.

$$\begin{aligned} \tilde{A}_i \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} f_i \\ g_i \end{pmatrix} \\ \tilde{A}_i &= \begin{pmatrix} B_i & E_i \\ F_i & C_i \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6)$$

x_i, f_i 는 영역 내부의 값이고 y_i, g_i 는 영역 외부의 값이다. B_i 는 영역 내부 절점간의 행렬이고 E_i, F_i 는 영역 내부와 외부 절점간의 행렬이다. C_i 는 영역 외부 절점간의 행렬이다.

효과적인 병렬화를 위해 프로세서간의 계산량을 균등하게 분배하고 자료교환을 최적화하도록 영역을 분할하여야 한다. 본 연구에서는 표준예제의 경우 계산 영역의 분할이 용이하도록 2 차원 문제의 경우 직사각형, 3 차원 문제의 경우 직육면체로 이루어진 정렬 격자계를 2, 3 차원 분할을 하여 병렬계산을 수행한다. 비정렬격자계를 사용할 경우 Metis-lib 를 사영하여 계산 영역을 분할한다. 여러 예조건인자의 성능을 비교 검토한 결과 본 연구에서 사용된 분리 알고리즘에 근거한 비압축성 유동해석에는 BIWO 가 가장 좋은 성능을 나타내었다. BIWO 를 예조건인자로 사용한 PCG (Preconditioned Conjugate Gradient) 알고리즘은 수렴하게 될 때까지 아래의 식들을 반복하게 되며 초기 잔여 벡터는 $\{r_0\} = \{f\} - [A]\{x_0\}$ 과 같이 정의된다.

$$\alpha_j = \frac{\{z_j\}^T \{r_j\}}{\{d_j\}^T [A]\{d_j\}} \quad (7)$$

$$\{x_{j+1}\} = \{x_j\} + \alpha_j \{d_j\} \quad (8)$$

$$\{r_{j+1}\} = \{r_j\} - \alpha_j [A]\{d_j\} \quad (9)$$

$$\{z_{j+1}\} = [M]^{-1} \{r_{j+1}\} \quad (10)$$

$$\beta_j = \frac{\{z_{j+1}\}^T \{r_{j+1}\}}{\{z_j\}^T \{r_j\}} \quad (11)$$

$$\{d_{j+1}\} = \{z_{j+1}\} + \beta_j \{d_j\} \quad (12)$$

반복해법의 수렴속도는 행렬의 조건수(condition number)에 영향을 받으며 예조건화 기법은 조건수를 줄이는 방법으로 행렬의 수렴속도를 가속화한다. 일반적으로 ILU(Incomplete LU factorization)계열의 예조건화 기법들이 순차 계산에서 좋은 수렴 속도를 보이지만 순차적인 계산 과정을 필요로 하므로 병렬 계산에 적용하려면 알고리즘의 수정이 필요하게 된다. 본 논문에서는 MIRA 모델주위의 유동장 계산에 사용된 BIOW에 대해 간략히 설명한다[8].

Block ILU(0) without overlapping(BIWO)

일반적인 ILU(0) 예조건화 기법을 사용하면 예조건화 인자 $[M] = [L][U]$ 의 형태로 나오므로 식 (10)은 $[L][U]\{z_{j+1}\} = \{r_{j+1}\}$ 이

되며 전진대입법과 후진대입법을 이용하여 $\{z_{j+1}\}$ 을 구한다. 이 방법은 계산 영역 전체의 행렬을 순차적으로 이용하여 예조건화인자를 구성하여 $\{z_{j+1}\}$ 을 구하므로 병렬화하는 데 어려움이 있다.

BIWO는 ILU 예조건화를 전체의 계산 영역 대신 분할된 각 국소영역에 독립적으로 적용시키는 것이다. $[A_j] = [B_j] + [E_j]$ 에서 이웃하는 국소영역과 관련된 부분의 행렬인 $[E_j]$ 를 무시하고 $[B_j]$ 만을 ILU 예조건화 한다. $[E_j]$ 를 무시함으로써 각각의 프로세서는 예조건화인자 $[M_j] = [L_j][U_j]$ 를 구하는 과정과 $[L_j][U_j]\{z_{j+1}\} = \{r_{j+1}\}$ 의 과정을 독립적으로 수행하는 장점이 있다. 그러나 경계 부분의 행렬 $[E_j]$ 를 무시하므로 영역을 분할하면 할수록 무시되는 항들이 증가하여 반복계산 횟수가 증가하는 단점을 가진다.

2.3 병렬예조건 인자의 성능비교

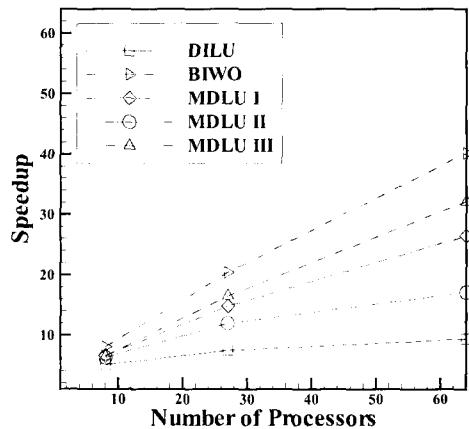


Fig. 1 Comparison of various preconditioners: Laplace equation ($64 \times 64 \times 64$)

Fig. 1은 3 차원 라플라스 방정식을 개발된 병렬코드를 이용하여 풀었을 때 각 병렬 예조건 인자의 성능을 비교한 것이다. BIOW 가 DILU (Distributed ILU)나 수정된 DILU (MDLU #) 병렬 예조건 인자보다 성능이 좋음을 알 수 있다. 프로세서수가 64 개일 때 약 40 배의 속도향상을 얻었으며, 이는 문제의 크기가 커질수록 커지게 된다. 여기서 주의할 점은 본 연구에서 얻은 40 배의 계산속도는 serial 코드의 예조건 인자로 성능이 우수하다고 잘 알려져 있는 ILU(0)[10]를 serial 코드에 적용한 경우와 비교한 것이다.

2.4 MIRA 모델 주위의 난류유동장 해석

$Re = 2 \times 10^6$ 의 MIRA 모델 주위의 난류 유동을 LES 모델과 SUPG 방법을 사용하여 계산하였다. 레이놀즈 수는 입구 속도, MIRA 모델의 높이와 유체의 점성으로 정의된다. 비정렬 격자를 생성하기 위해 ICEM-CFD를 사용하였으며 약 200 만개의 격자점으로 구성되는 Grid I과 약 280 만개의 격자점으로 구성되는 Grid II, 그리고 약 670 만개로 구성되는 Grid III의 세 격자계를 형성하였다. Fig. 2은 임의의 평면에서 MIRA 모델 주위의 비정렬 격자계를 보여준다. 벽과 후류 영역에 상대적으로 조밀한 격자가 사용되었다.

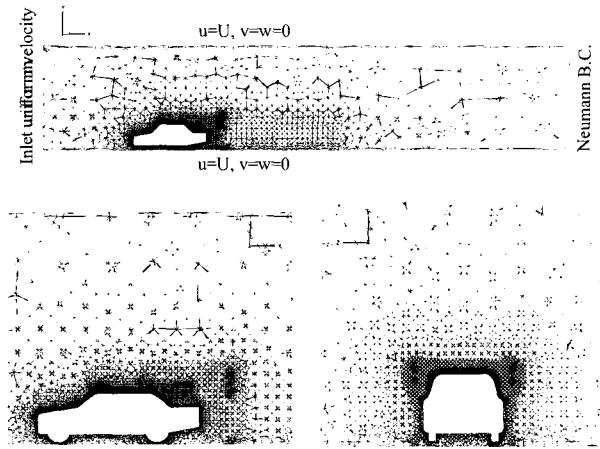


Fig. 2 Unstructured mesh around the MIRA model

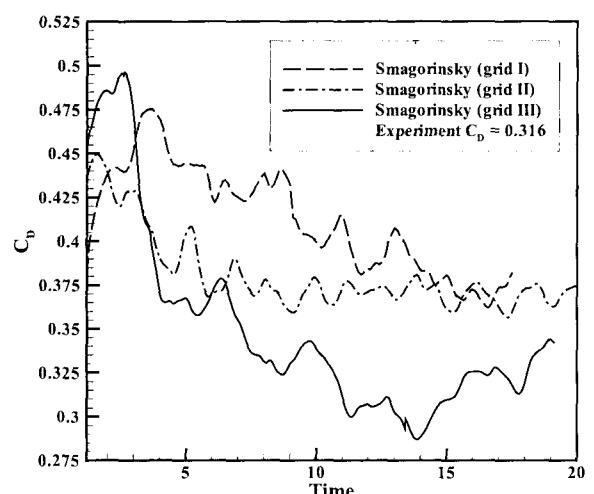


Fig. 3 Drag history of the MIRA model at $Re = 2.6 \times 10^6$

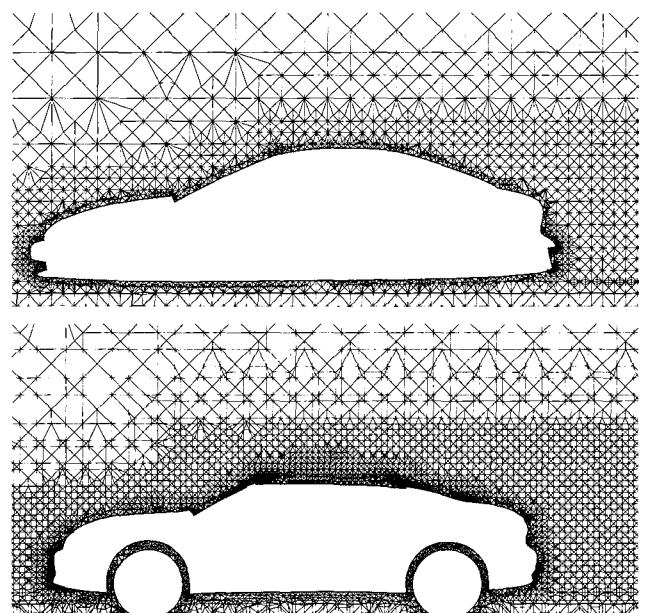


Fig. 4 Unstructured mesh around the Tiburon model

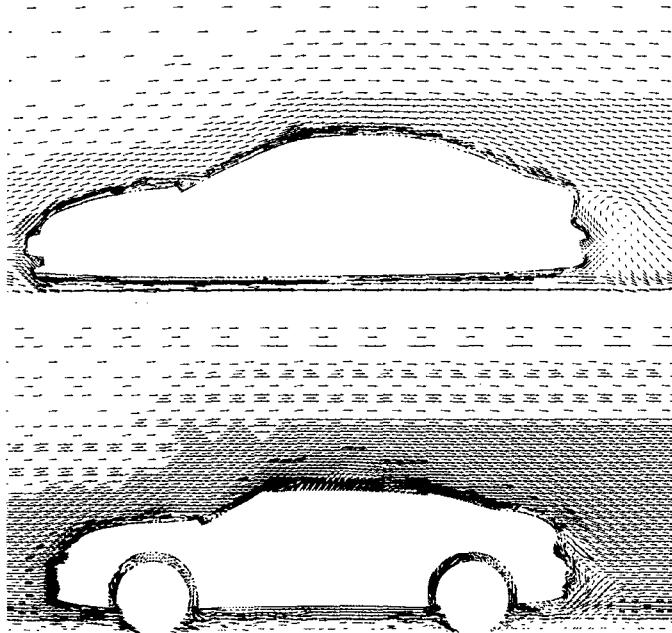


Fig. 5 Velocity field around the Tiburon model

Fig. 3에서 Grid III 으로부터 얻어진 항력계수는 Grid II 를 이용하여 얻어진 결과보다 더 정확함을 볼 수 있다. Grid III 으로부터 예측된 항력계수는 실험치와 약 5%의 오차범위 안에 존재한다. 본 연구에서 개발된 병렬코드를 실제문제에 적용하기 위하여 Tiburon 모델주위의 난류 유동장을 레이놀즈 수 7.4×10^5 에서 계산하였다. Fig. 4는 모델주위의 비정렬 격자계를 보여준다. 본 계산에서 사용된 격자의 수는 약 150 만개로, 격자수가 해에 미치는 영향을 보기 위해서 추후에 약 300 만개의 절점을 사용한 해의 결과와 비교하고자 한다. Fig. 5는 Tiburon 모델 주위의 몇 단면에서 초기 계산단계에서의 속도 분포를 보여준다. 계산은 현재 진행중이며, KISTI 의 IBM SMP cluster 병렬컴퓨터의 32 개 CPU 를 사용할 경우 일 주안에 결과가 얻어질 것으로 예측된다.

3. 결론

대규모의 비압축성 유체 문제를 해석하기 위한 병렬 유한요소 해석코드를 개발하여 자동차모형 주위의 난류유동장을 KISTI 의 IBM SMP cluster 병렬컴퓨터를 이용하여 해석 좋은 결과를 얻었다. 개발된 코드는 영역분할기법에 기반하여 병렬화 하였다. 영역의 분할은 Metis-lib를 사용하고 영역간의 통신을 위하여 MPI library 를 이용하였다. 비정렬 격자계에 사용된 노드 수는 약 7 백만 개로 비정상계산을 하기위해서 시간간격을 0.003 으로 했을 때 약 20 초 동안을 해석하는데 약 3 주일 정도가 소요되었다. 유한요소기법을 이용하여 본 연구에서 개발된 열 유체 해석용 병렬코드는 앞으로 많은 대규모의 열유체 문제를 해석하는 데 유용한 도구가 될 것이다.

후기

본 연구는 차세대자동차 기술개발 사업과 BK21 사업 그리고 한국과학기술정보연구원(KISTI) 슈퍼컴퓨팅센터의 제 4 차 전략과제의 지원하에 수행되었으며 이에 감사 드립니다.

참고문헌

- [1] Choi, H. G., Choi, H., and Yoo, J. Y., "A Fractional Four-Step Finite Element Formulation of the Unsteady Incompressible Navier-Stokes Equations Using SUPG and Linear Equal-Order Element Methods", Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 143, (1997), pp. 333-348.
- [2] http://www.aem.umn.edu/Solid-Liquid_Flows, Direct Simulation of the Motion of Particles in Flowing Liquids, NSF KDI/New Computational challenge.
- [3] Johnson, A. A., and Tezduyar, T. E., "Parallel Computation of Incompressible Flows with Complex Geometries", Inter. J. for Numerical Methods in Fluids, 24, (1997), pp. 1321-1340.
- [4] Jansen, K., "A Stabilized Finite Element Method for Computing Turbulence", Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 174, (1999), pp. 299-317.
- [5] <http://eddy.snu.ac.kr>, MICRO/BIO Flow Systems Lab.
- [6] H.G. Choi and J.Y. Yoo, A streamline upwind scheme for the segregated formulation of the Navier-Stokes equation, Numerical Heat transfer, Part B, Vol.25, (1994), pp.145-161.
- [7] Van der Vorst, H. A., "Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Non-symmetric Linear Systems", SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 12, (1992), pp. 631-634.
- [8] 강성우, 최형권, 유정열, 영역분할 Navier-Stokes 방정식의 예조건화, (2002), To be submitted.
- [9] Choi, H., and Moin, P., "Effects of the Computational Time Step on Numerical Solutions of Turbulent Flow", J. Comp. Phys., 113, (1994), pp. 1-4.
- [10] Saad, Y., Iterative Methods fro Sparse Linear Systems, PWS Publishing Company, (1996), p. 269.
- [11] Special Feature, "Validation of CFD Codes for Predicting Aerodynamic Performance", Collated by Geoff Carr, Automotive Engineer, 17, (1992), pp. 46-